



TITLE:

Spin Glass and Ultrametricity

AUTHOR(S):

根本, 幸児

CITATION:

根本, 幸児. Spin Glass and Ultrametricity. 物性研究 1988, 51(2): 226-235

ISSUE DATE:

1988-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93497>

RIGHT:

ここ数年のうちに、スピングラス (SG) という磁性体の研究の一部分に、階層構造を表現する ultrametricity という概念が現われてきた。「ガラス的な様相として系が持っている多様な準安定状態が、位相空間の中で階層的に構成されている。」このような解釈のできるスピンモデルが SG の平均場モデルである。この報告ではこのモデルからどの様にして階層構造がでてくるかを簡単に解説したい。

1. はじめに

SG は、ランダムスピン系の一つで、一言でいえば、正負の相互作用がランダムに存在するスピン系を指す。SG では、相互作用の競合がそこここに存在し、欲求不満 (フラストレーション) を起こしている。a と b、b と c のスピン間に正 (強磁性的) の、a と c の間に負 (反強磁性的) の相互作用がある場合が最も簡単な例で、どの様なスピン配位をとっても三つの相互作用エネルギーをフルに得することができない。このようなフラストレーションのため、低温になっても、いかなる波数の長距離秩序もできない。しかし、各々のスピンは、(少なくとも測定時間内では) 自分の思う方向に「凍結」しているように見える。この辺が SG の名前の由来なのだろうが、実験的にはこの「凍結」が余りにも突然起こるので、何か新しい相転移ではないかと多くの理論家の興味を引いた。その成りゆきをここに記す責も力も筆者にはないので、レビューを文献 [1] として挙げておきます。

さて、ガラスの様相として考えてみれば、SG 系には様々な準安定状態があるであろう事は想像に難くない。その動的性質も踏まえて、凍結の概念的描像はしばしば多重の谷構造を持つ自由エネルギーによって表現される。即ち、低温では自由エネルギー空間に殆ど縮退した多数の準安定状態が存在し状態がその一つにトラップされている、というものである。この描像自体はもっともらしく思えるものであるが、これを統計力学的に記述することは非常に困難である。SG の統計理論を考える上で直面する問題はまさにこの点にあったといえる。例えば SG

の秩序変数にしても、どう設定すべきかは自明な問題ではない。S G凍結を相転移現象として捉え、その平均場理論を最初に提出したEdwards-Anderson (E A) は、とにかく凍結相では個々のスピンの有限の自己相関を持つとして

$$(1) \quad q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \langle s_i(0) s_i(t) \rangle \rangle_J = \langle \langle s_i^2 \rangle \rangle_J \quad (\langle \rangle_J \text{ はランダム平均})$$

で定義される秩序変数を導入した[2]。しかし、その後のイジングS Gの平均場模型における解析によって、S G相は q_{EA} では十分に記述できないことが判明し（この模型ではS G凍結が転移として起こる[3]）、平均場の範囲でさえS G相の記述が煩雑なものとならざるを得なくなった。現在では、平均場模型のS G相はParisi仮説を用いたレプリカ法と呼ばれる手法（後述）で正確に記述されると考えられているが、その物理的背景に前述の「多重谷構造」の描像があるとする立場が支持されている。そしてその描像にたって解析を進めると、谷の構造が階層的になっているという解釈にたどりつくのである。このことは、谷底の間のある種の距離を考えたとき、その距離が平均的にはultrametricになっていることから結論された。ランダム系にそのような構造が内在しているという結論は驚くべき事かも知れない。この報告はランダム系のある模型からその準安定状態の階層構造を引き出した経緯を概説することを主な目的としたい。

2. Ultrametricityについて[4]

Ultrametricityという語は、1944年につくられたそうで、数学辞典（第三版）の索引にもでていないマイナーな用語なのだが、概念は前世紀終わりからある古いものだそうである。計量空間（距離空間）が超計量的 (ultrametric) であるというのは、与えられた距離 ρ が、三角不等式よりも強い

$$(2) \quad \rho(c, a) \leq \max(\rho(a, b), \rho(b, c))$$

という条件を満たすことをいう。このような距離空間では、すべての三角形が斜辺より大きくない底辺を持つ二等辺三角形となる。というのは、

$$(3) \quad \rho(a, b) \leq \rho(b, c) \leq \rho(c, a)$$

を仮定すれば、(2)より

$$(4) \quad \rho(a, b) \leq \rho(b, c) = \rho(c, a)$$

がでてくるからである。この性質から、超計量空間は、距離について階層性を持っていることがわかる。

A. aを中心とする半径rの球は、それに含まれる点bを中心とする同一半径の球に等しい。 aの球内の任意点cは、bの球内の点でもある。なぜなら、 $\rho(a, c) \leq r$ 、 $\rho(a, b) \leq r$ なので、 $\rho(b, c) \leq r$ がいえからである。

B. ふたつの球は、共有点を持たないか、一方が他方を完全に含むかのどちらかである。 aを中心とする半径rの球と、bを中心とする半径r' ($\leq r$)の球に共有点cがあるとする。 $\rho(a, c) \leq r \leq r'$ 、 $\rho(b, c) \leq r'$ なので、 $\rho(a, b) \leq r'$ となって、aはbの球の内部にあることになる。ところがA. より、aの球はその内部の点の球に等しいので、同じ議論を適用すれば結局aの球の内部点はすべてbの球の内部にあることが結論される。

このことから、空間のすべての点は入れ子構造をなす球によって完全に分類されることになる。すなわち空間が階層的に構成されているというわけである。

3. レプリカ法におけるParisiの秩序変数関数q(x)

この節以降でイジングSGの平均場模型の統計理論を概観する。この模型は、1975年SherringtonとKirkpatrickによって提出され、SK模型と呼ばれている[3]。そのハミルトニアンは

$$(5) \quad \mathcal{H} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j, \quad s_i = \pm 1$$

として与えられる。ここで J_{ij} はすべてのスピン間に各々独立に与えられる平均0分散 $1/N$ (N はスピン数)のガウス分布に従うランダム変数である。SGのようなランダム系では、多くの場合そのランダム性がクエンチしている(例えば

S G の一つのサンプルではランダムに与えられた相互作用はどの温度でも不変である) と考えられる。したがって、熱力学量、例えば自由エネルギー F は、各々のサンプルのそのランダム平均として与えられるが、E A は、

$$(6) \quad -\beta F = \langle \log Z \rangle_J = \lim_{n \rightarrow 0} \{ \langle Z^n \rangle_J - 1 \} / n, \quad (\beta = 1/k_B T)$$

という等式を用いて、分配関数 Z を計算する前にサンプル平均を行うことを考えた [2]。実際整数べき n においては n 個のレプリカを用意して $\langle Z^n \rangle_J$ のサンプル平均が計算でき、結果としてイシング S G の平均場模型では問題がレプリカスピンの有効ハミルトニアン

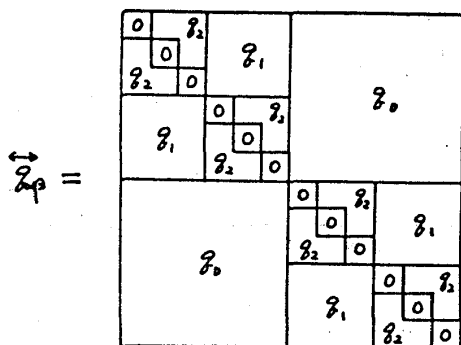
$$(7) \quad \mathcal{H}_{\text{eff}} = - \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} q_{\alpha\beta} s_\alpha s_\beta + [\text{スピンの依存しない項}] \quad (\alpha, \beta \text{ はレプリカ指標})$$

に変換される。ここで有効相互作用 $q_{\alpha\beta}$ は $q_{\alpha\beta} = \langle s_\alpha s_\beta \rangle_{\text{eff}}$ として自己無撞着に与えられ $n \rightarrow 0$ の極限で S G 秩序変数となるべき量である。S K は (7) のレプリカ対称性から、 q もレプリカ指標によらないと仮定したが、その結果は低温相で破綻した (この模型では $k_B T = 1$ で S G 転移を起こす)。その原因は、S G 相で $q_{\alpha\beta}$

についてのレプリカ対称性が自発的に破れている (R S B) ことにある [5]。

即ち、レプリカ法では S G 転移は R S B によって特徴づけられるわけである。実

際どのような R S B をとるかで多くの試行錯誤があったが、現在最良の方法として認められているのが Parisi による R S B 仮説である [6]。この仮説によれば、 $q_{\alpha\beta}$ は図 1 のような入れ子構造の行列で表され、 $n \rightarrow 0$ の極限で秩序変数関数 $q(x)$ ($0 \leq x \leq 1$) に移行し、自由エネルギーは $q(x)$ の汎関数として表現される。その結果は少なくとも物理的な破綻を示さず、現在では正しい記述であると信じられている。その物理的背景に次節で述べる「多重谷構造」の描像との対応解釈があり、仮想的なレプリカスピンを用い



$n = 12$ の例



1

るこの方法を正当化する状況証拠となっている。

4. 「多重谷構造」の描像との対応関係

各々のサンプルにおける自由エネルギー空間の表式としては、各々のスピンの磁化の組 $\{m_i\}$ を変数とする Thouless らの自由エネルギー表式がある [7]。その停留条件から

$$(8) \quad m_i = \tanh \left[\beta \sum_j (J_{ij} m_j - m_i J_{ij}^2 \beta (1 - m_j^2)) \right]$$

という状態方程式が得られる。この方程式は転移温度以下で $\exp(\alpha N)$ に比例する解を持つことが知られている (α は温度の関数 [8])。各々の谷は無限の高さの障壁に囲まれているので [9]、谷の極小点に対応する状態を純粋状態 (pure state) と呼ぶことにすると、SG 転移は位相空間が多数の純粋状態に分割することに伴う転移と考えられる。純粋状態は自由エネルギー的にほぼ縮退しているので、統計力学的平均には複数の純粋状態が参加することを考慮しなければならない。特に秩序変数の計算に重要となる量は純粋状態間の重なる分布関数 $P(q)$ である。

$\{m_i^a\}$ を a 番目の純粋状態、 F_a をその自由エネルギーとすれば

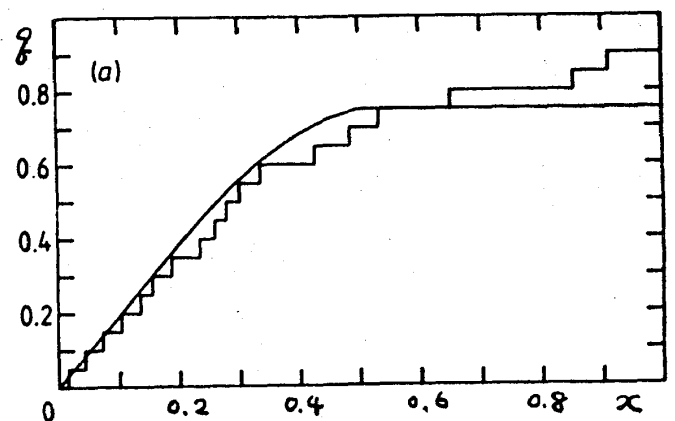
$$(9) \quad P(q) = \langle \sum_{a,b} W_a W_b \delta(q - q_{ab}) \rangle_J$$

ここで W_a, q_{ab} は

$$(10) \quad W_a = \exp(-\beta F_a) / \sum_b \exp(-\beta F_b),$$

$$(11) \quad q_{ab} = \sum_i m_i^a m_i^b / N$$

と与えられる。 q_{ab} は 2 状態間のオーバーラップを表している。レプリカ法との対応解釈の議論によれば [10]、この分布関数が Parisi の関数 $q(x)$ と



$$k_B T = 0.4$$

□

2

$$(12) \quad dx/dq = P(q)$$

という関係で結ばれる。この関係は数値解析からも確かめられている[9, 11, 12]。実際、図2に示すようにその右辺を用いて(8)の解から数値計算された $q(x)$ （ヒストグラム）はレプリカ法による計算（曲線）とよく一致している[13]。また内部磁場分布に対する対応関係についても、やはり同様な定量的一致が確認されている[13]。

さらにこの対応を押し進めて行くと、様々な興味深い谷構造の性質が预言される。その一つが階層性である。 $q_{\alpha\alpha}$ は平均的には状態によらず同じ値と考えられるので、オーバーラップが大きいほど距離は小さい。そこで純粋状態の3状態間の重なり分布関数を考え、レプリカ法によってそれを計算すると次のようになる[14]。

$$\begin{aligned} (13) \quad P_3(q_1, q_2, q_3) &\equiv \langle \sum_{a,b,c} W_a W_b W_c \delta(q_1 - q_{ab}) \delta(q_2 - q_{bc}) \delta(q_3 - q_{ca}) \rangle_J \\ &= \{ P(q_1) x(q_1) \delta(q_1 - q_2) \delta(q_2 - q_3) \\ &\quad + P(q_1) P(q_2) \theta(q_1 - q_2) \delta(q_2 - q_3) \\ &\quad + P(q_2) P(q_3) \theta(q_2 - q_3) \delta(q_3 - q_1) \\ &\quad + P(q_3) P(q_1) \theta(q_3 - q_1) \delta(q_1 - q_2) \} / 2 \end{aligned}$$

この分布の意味するところは $q_1 \geq q_2 = q_3$ とその置換対称の領域にしか値を持たないということである。これは(4)式と同じことを意味しているので、平均的には、純粋状態の集合にultrametricな距離を定義することができると結論する事ができる。言い替えれば q を指標とする階層性を持つということである。ランダム系にこのような階層性が内在しているとは多少驚くべきことではある。ただこの性質はParisi仮説による秩序変数の設定に起因すると思われるので、ある意味では作意的ともいえるかも知れない。しかし、たしかに数値解析からもこの階層性の存在(ultrametricity)を示唆する結果が得られているので[15]、本質的に系の持つ性質である可能性は否定できない。

5. バリアの高さを指標とする階層性

この節では、準安定状態が多数存在するときに、そこで階層性がどの様に顔を出すかを考えてみる。実はバリアエネルギーに関してみれば次のようにして階層構造を引き出すことができる[16]。

系が各準安定状態の間を熱的なバリアホッピングによって移り変わることを考えてみよう。十分低温では、状態を移るとき越えなければならない最低のバリアが実質的な遷移過程を支配すると考えてよいであろう。つまり、自由エネルギー空間において状態間を結ぶ経路を考え、一つの経路の中での最高の自由エネルギーをその経路のコ

ストとした時、最もコストの低い経路のみを通して遷移が起こると考えられる。そこで、準安定状態とそれらを結ぶ最低コストの経路（ネットワーク）だけを取り出してみる。このように作られたネットワークは一般にループを持たない。今仮に a, b, c の3状態をとってきて、それらの間の最低コスト（バリア）を F_{ab}, F_{bc}, F_{ca} ($F_{ab} < F_{bc} < F_{ca}$) とする（図3）。ところが F_{ca} が最低コストという

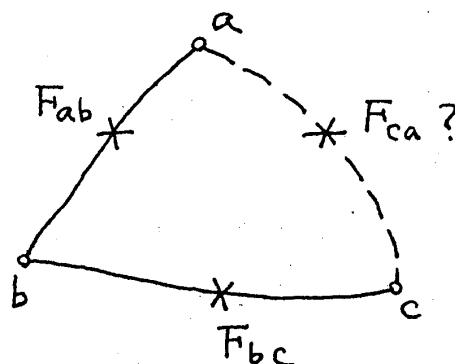
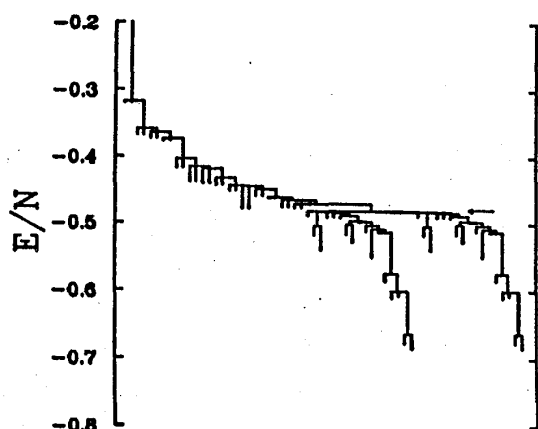


図 3



図

4

のは明らかに間違いである。 $c - a$ 間を直接結ぶ経路よりも $c - b - a$ とたどる経路の方がコストが低いからである。したがって(4)によく似た $F_{ab} < F_{bc} = F_{ca}$ という関係が成り立つ。このようにループを持たないネットワークによって最低コストの経路が表現されていれば、状態間のバリアエネルギーを木のグラフ（あるいは家系図もどき）として書くことができるが、これは階層構造の表現にはかならない[4, 17]。このように考えると、準安定状態が多数存在すれば、バリアエネルギーに関してはおく自然に階層性が現われることになる。この考えにし

たがって S K 模型のあるサンプルについて $T=0$ における木構造を表わしたのが図 4 である [18]。縦軸にエネルギーがとってあり、それぞれの下端に状態がぶら下がっている。また、2 状態間の距離が離れるほどそのあいだのバリアが高くなると考えられるが、実際、数値解析からそのことが確かめられており [18]、前節で述べたように、オーバーラップに関しても階層構造が存在すると考えてもよさそうである。

6. おわりに

以上、S G の平均場模型における ultrametricity について概観した。S G の平均場理論においては、レプリカ法によって純粋状態の統計的性質を解析でき、またその階層構造も予見することができた。加えて、多くの数値解析もそれを支持している。というわけで、ランダム系にも豊富な構造を見ることができるということがわかってきたのである。これからは、このような構造が実際の系の振舞いにどう反映されるかが問題となろう。例えば階層性に付随した無限連続転移の可能性も一考に値するであろう（この描像は以前から磁化－温度曲線の履歴現象の定性的説明に用いられてきた [19]）。一方このような谷構造の解析は動的性質、特に緩和時間の分布の解明にも重要である。現在のところはスピン系を離れ、階層性を持つ空間での緩和が議論されており、べき関数、引き延ばされた指数関数などに従う長緩和の可能性が指摘されている [20]。これらの議論が準安定状態の構造とどう有機的に結びつくか、今後の進展に期待されるところである。

また、もちろん S G 問題の枠を越えて他のランダムな縮退を持つ系への適用もなされつつある。例えば、巡回セールスマンの問題 [21] やグラフ分割の問題 [22] など、最適化問題に対する統計力学的考察や、多くの準安定状態を制御した情報検索法の研究への適用 [23] が進んでいる。この辺の応用と問題意識については、文献 [24] を参照されたい。

参考文献

- [1] K. Binder & A. P. Young, Rev. Mod. Phys. 58 (1986) 8010
- [2] S.F. Edwards & P.W. Anderson, J. Phys. F5 (1975) 965
- [3] D. Sherrington & S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1792
- [4] R. Rammal, G. Toulouse & M.A. Virasoro, Rev. Mod. Phys. 58 (1986) 765
- [5] J.R.L. de Almeida & D.J. Thouless, J. Phys. A11 (1978) 983
- [6] G. Parisi, J. Phys. A13 (1980) L115, 1101, 1887
- [7] D.J. Thouless, P.W. Anderson & R.G. Palmer, Phil. Mag. 35 (1977) 593
- [8] A.J. Bray & M.A. Moore, J. Phys. C13 (1980) L469
- [9] N.D. Mackenzie & A.P. Young, J. Phys. C16 (1983) 5321
- [10] G. Parisi, Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 1946; C. De Dominicis & A.P. Young, J. Phys. A16 (1983) 2063
- [11] N. Parga, G. Parisi & M.A. Virasoro, J. Phys. Lett. 45 (1984) L1043
- [12] K. Nemoto & H. Takayama, J. Phys. C18 (1985) L529
- [13] K. Nemoto, J. Phys. C20 (1987) 1325
- [14] M. Mezard, G. Parisi, N. Surlas, G. Toulouse & M. Virasoro, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1156
- [15] N. Surlas, J. Phys. Lett. 45 (1984) L949; R.N. Bhatt & A.P. Young, J. Magn. Magn. Mater. 54-57 (1986) 191
- [16] M. Mezard, N. Surlas & G. Toulouse, "Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics" (1987 Springer) 238
- [17] R. Rammal, J.C. Angles d'Auriac & B. Doucot, J. Phys. Lett. 46 (1985) L945
- [18] K. Nemoto, J. Phys. A (1988) in press
- [19] R. G. Plmer, Adv. Phys. 31 (1982) 669
- [20] R. G. Palmer, D. L. Stein, E. Abrahams & P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 958; A. T. Ogielski & D. L. Stein, Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 1634

- [21] S. Kirkpatrick & G. Toulouse, J. Physique **46** (1985) 1277
- [22] Y. Fu & P. W. Anderson, J. Phys. **A19** (1986) 1605
- [23] D. J. Amit, H. Gutfreund & H. Sompolinsky, Phys. Rev. Lett. **55**
(1985) 1530
- [24] J.L. van Hemmen & I. Morgenstern (edt), "Heidelberg Colloquium
on Glassy Dynamics" (1987 Springer); M. Mezard, G. Parisi and
M.A. Virasoro, "Spin Glass Theory and Beyond" (1987 World
Scientific)